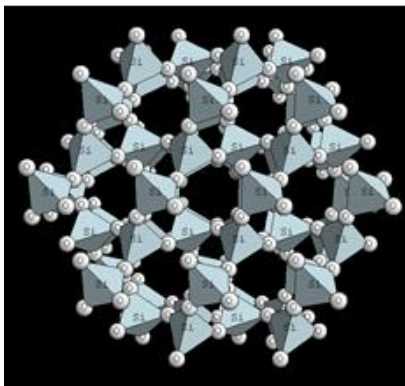


INTRODUCCION

El hecho más importante y fundamental relativo a las sustancias cristalinas es que las partículas que las forman están dispuestas de manera ordenada. Un cristal debe por lo tanto, ser descrito como una asociación de un gran número de unidades extraordinariamente pequeñas distribuidas en una serie de distribución tridimensional. La nota característica de la estructura cristalina es repetición, y mecanismos de repetición de la disposición interna de los cristales han sido parangonados a los de los papeles de empapelar paredes, linóleo o estampados. La geometría de la distribución de las unidades que forman un cristal puede ser descrita, como la imagen de un papel, en función de un motivo o unidad fundamental y las reglas según las cuales este motivo se repite.

Estructura cristalina



Cristal



Siempre tienen

No siempre forma

ESTRUCTURA INTERNA DE LOS CRISTALES

PUNTOS RETICULARES

Los puntos reticulares están ocupados por átomos, iones o moléculas que se mantienen unidas por fuerzas de van der Waals y/o de enlaces de hidrógeno. Los cristales moleculares suelen empaquetarse tan juntos como su forma y tamaño lo permitan dando lugar a motivos que se repiten desde cada 5 Angstrom hasta las centenas de Angstrom.

RED GEOMÉTRICA DE PUNTOS EN EL PLANO

Si unimos los puntos idénticos en dos dimensiones mediante dos familias de rectas obtendremos una red geométrica de puntos. En este conjunto de puntos reticulares, todos los puntos tienen exactamente los mismos alrededores, y son idénticos en posición con relación al patrón o motivo que se repite. Una red de puntos no necesariamente es una red geométrica.

Los principales elementos estructurales de una red geométrica son:

- **Fila**, formados por nodos o puntos materiales que determinan un periodo.
- **Fila reticular**, puntos materiales o nodos que se repiten periódicamente en una dirección.
- **Plano**, tres puntos que no se hallen en la misma fila determinan un plano sobre el cual se encuentran repetidos por traslación.
- **Malla**, es la unidad de medida de un plano reticular y está definido por dos traslaciones o periodos correspondientes a dos filas no paralelas de un plano y su valor angular.
- **Red** viene definida por las 3 direcciones y las distancias según las cuales el motivo se repite. Se ha demostrado que solo es posible tener 14 tipos de redes espaciales

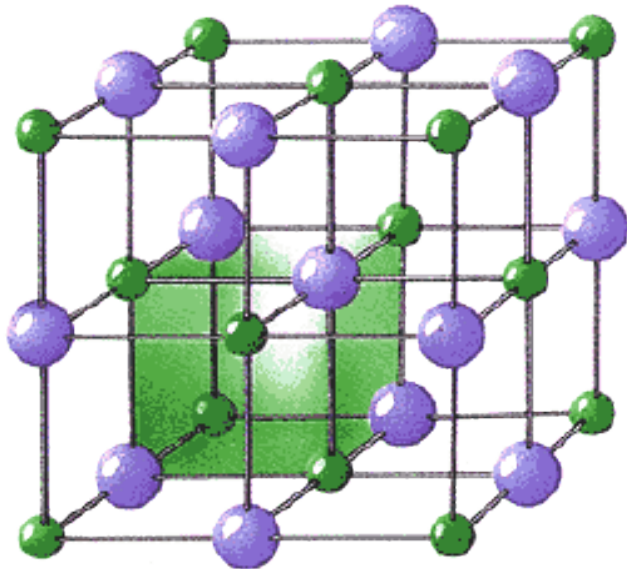
En función del valor de los espaciados y del ángulo de intersección de las familias de rectas se generan 5 tipos distintos de redes geométricas en el plano: cuadrado, rectangular, hexagonal oblicuas y rectangular centrada.

Cuadro. Las Cinco Unidades patrón en dos dimensiones

<i>Nombre de la red</i>	<i>Ejes de la celda</i>	<i>Ángulos</i>
<i>Oblicua o romboidal</i>	$a \neq b$	$\neq 90^\circ$
<i>Rectangular</i>	$a \neq b$	$= 90^\circ$
<i>Rómbica</i>	$a=b$	$\neq 90^\circ$
<i>Cuadrada</i>	$a=b$	$= 90^\circ$
<i>Hexagonal</i>	$a=b$	$= 60^\circ \text{ ó } 120^\circ$

- **Nodo**, punto de la red geométrica de puntos; y en una red planar los nodos ubicados en los vértices de las celdas unitarias están compartidos con otras 3 celdas vecinas.
- **Celdas primitivas**, cuando les pertenece un solo nodo. Es importante señalar que todas las celdas primitivas tienen la misma área.
- **Celdas múltiples** a las que tienen dos o más nodos.
- **Celda unitaria**, es la unidad básica que al ser repetida por translación desde un punto reticular a otro engendra la red completa. La celda unidad se elige a menudo de manera tal que, por sí misma, revela por sí misma la simetría de la red. Esto, algunas veces, da lugar a celdas de mayor tamaño, que no son primitivas. La elección de **la celda unidad** es arbitraria hasta cierto punto. Por ejemplo, no necesita siempre ser primitiva y, además, puede tener formas diferentes.

La celda unidad no puede ser jamás menor que un átomo, debido a que las relaciones entre los átomos y las fuerzas que los unen son factores importantes que determinan las propiedades del cristal. El número de átomos en una celda unidad es, en general, pequeño, entero o un múltiplo de la fórmula química más sencilla. Así, en el cuarzo la unidad estructural tiene $3(\text{SiO}_2)$ en la Halita $4(\text{NaCl})$.



RED GEOMÉTRICA DE PUNTOS EN EL ESPACIO

En un orden tridimensional necesitamos una tercera dirección (vector), para describir la distribución de nodos en una red tridimensional (espacial).

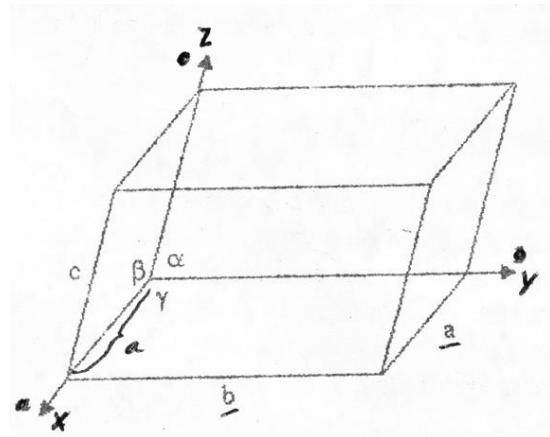
Si tenemos tres vectores no coplanares a, b, c y un origen, el conjunto de las extremidades de los vectores teniendo como origen O iguales a: u, v, w (son números reales

$$r_{u,v,w} = ua + vb + wc$$

Un punto cualquiera de la red (nodo), está definido por la ecuación. Basta conocer lo que hay en cada nodo para poder, conociendo los tres vectores, reproducir la red, y por consecuencia, el cristal.

Fig. Constantes reticulares o parámetros de red de una celda unitaria

El ángulo α es el ángulo entre b y c , β es entre a y c , y γ es entre a y b .



Cuadro. Transformación de las celdas primitivas del plano en las correspondientes del espacio.

CELIDAS EN EL PLANO	CELIDAS EN EL ESPACIO
Oblicuas	Triclínica y Trigonal
Rectangular	Ortorrómbico y Monoclínica
Hexagonal	Hexagonal
Cuadrada	Cúbica y Tetragonal

Cuadro. CARACTERÍSTICAS EN LAS CELIDAS EN EL ESPACIO

TIPO DE CELDA	MÓDULOS	ÁNGULOS
Triclínica	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \quad \beta \neq 90^\circ$
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal o Romboédrica	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cúbica	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

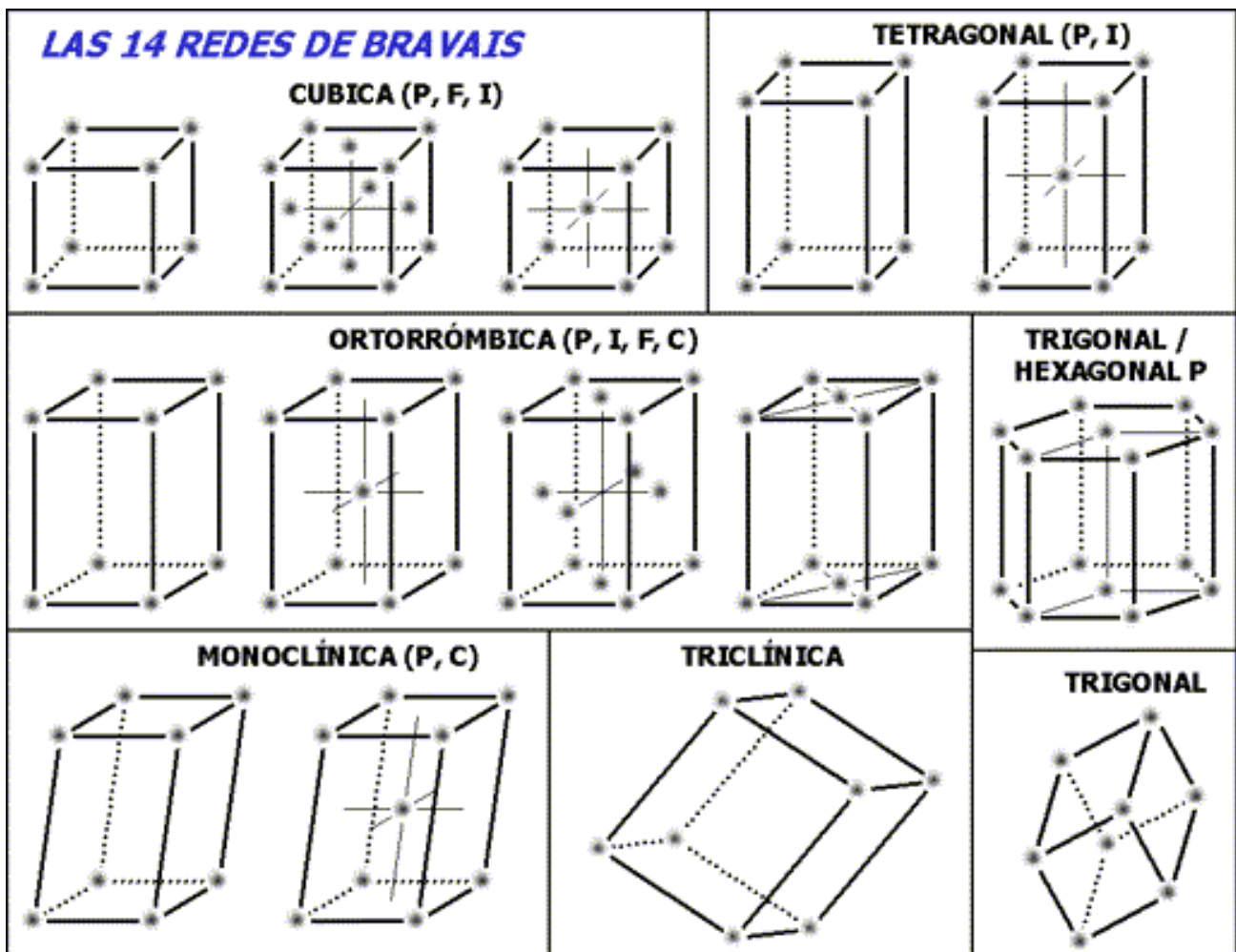
REDES DE BRAVAIS

Las celdas unidades se distribuyen en los puntos de una red tridimensional de tal manera que todos ellos tienen idéntico alrededor. La red viene definida por las 3 direcciones y las distancias según las cuales el motivo se repite. Se ha demostrado que solo es posible tener 14 tipos de redes espaciales; otras combinaciones de puntos destruyen lo requerido por la red según la cual la distribución de puntos alrededor de cada punto debe ser idéntico a los demás puntos. Esto fue demostrado por Bravais en 1848, y por tanto, las redes se conocen como las 14 redes espaciales de Bravais.

Una Red de Bravais es sencillamente una red geométrica de puntos en el espacio formada por unidades que se repiten. Existen solamente 14 redes de Bravais en total.

Se diferencian entre sí por la longitud de las aristas y los ángulos (α , β , γ) y los ángulos entre las aristas. Otras redes tienen otros puntos en el centro de las caras o en la diagonal espacial y son las celdas múltiples. (El ángulo α es el ángulo entre b y c, β es entre a y c, y γ es entre a y b.)

Se ha demostrado que las distintas maneras de empaquetar, combinados con los 14 tipos reticulares, dan lugar a solo 230 maneras posibles de distribución. Estas se conocen como los Grupos Espaciales.



ESTRUCTURA CRISTALINA

Una estructura cristalina se forma colocando lo que se conoce con el nombre de base o motivo en cada punto de la red bravais. Una base puede consistir en un sólo átomo(o ión), un grupo de átomos o una molécula. La base, idéntica en disposición y orientación, se encuentra en cada punto de la red. En este aspecto se obtiene el cristal repitiendo la base en el espacio, tal como prescribe la red particular de bravais o espacial. De esta forma existen muchas estructuras cristalinas diferentes.

SISTEMAS CRISTALINOS

Hay siete diferentes clases de celda que son suficientes para incluir todas las posibles redes de puntos. Estos corresponden a siete **sistemas cristalinos** dentro de los cuales todos los cristales pueden clasificarse

Cuadro. Sistemas cristalinos con sus redes de bravais.

Sistemas	ángulos	Caras
Triclínica	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Simple
Monoclínica	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \beta \neq 90^\circ$	Simple Base centrada
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple Cuerpo centrado Base centrada Cara centrada
Trigonal o romboédrica	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ (< 120^\circ)$	Simple
Hexagonal	$a = b \neq c$ $(a_1 = a_2 = a_3 \neq c)$ $\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$	Simple
Tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple Cuerpo centrado
Cúbica	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Simple Cuerpo centrado Cara centrada

a_1 : Antero posterior

a_2 : Transversal.

a_3 : Vertical.

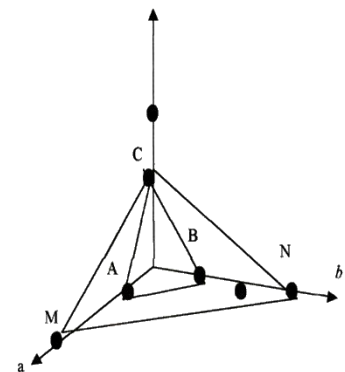
NOTACIÓN CRISTALINA

Se toman ciertas líneas de referencia que pasen por el centro del cristal ideal. Según el método de geometría analítica, a estos se denominan ejes cristalográficos y se toman paralelas a las aristas de intersección de las caras principales del cristal.

La mayoría de las 32 clases cristalinas tiene características comunes, lo cual permite su agrupación en 5 grandes grupos, denominados sistemas cristalinos.

- **Relación axial:** Es la relación de medida de las aristas de un cristal paralelo a los ejes cristalográficos con respecto a la longitud unitaria b , se refiere al periodo de identidad unidad (PIU) de un plano reticular el cual representa las distancias mínimas o longitudes relativas entre dos nodos que forman una arista de una celda unidad. Mediante el empleo de rayos x se puede medir estas dimensiones en unidad Angstrom ($^{\circ}A$). Así, para el mineral rómbico azufre, las dimensiones de la celda son; $a=10,45^{\circ}A$ $b=12,84^{\circ}A$ $c=24,37^{\circ}A$. Haciendo el valor de b igual a la unidad se puede escribir las relaciones $a:b:c = 0,814:1:1,898$. Estas relaciones expresan así las longitudes relativas, no las absolutas, de las aristas de la celda que corresponden a los ejes cristalográficos.
- **Parámetros:** Son valores que expresan las coordenadas relativas de la intersección de una cara con los ejes cristalográficos. Las caras de un cristal se definen mediante su intersección en los ejes cristalográficos: así, al describir una cara de un cristal es necesario determinar a cuántos cortan y cuáles son paralelos. Los parámetros son magnitudes parciales.

Plano ABC: $1a, 1b, 1c$ Plano MNC: $2a, 3b, 1c$



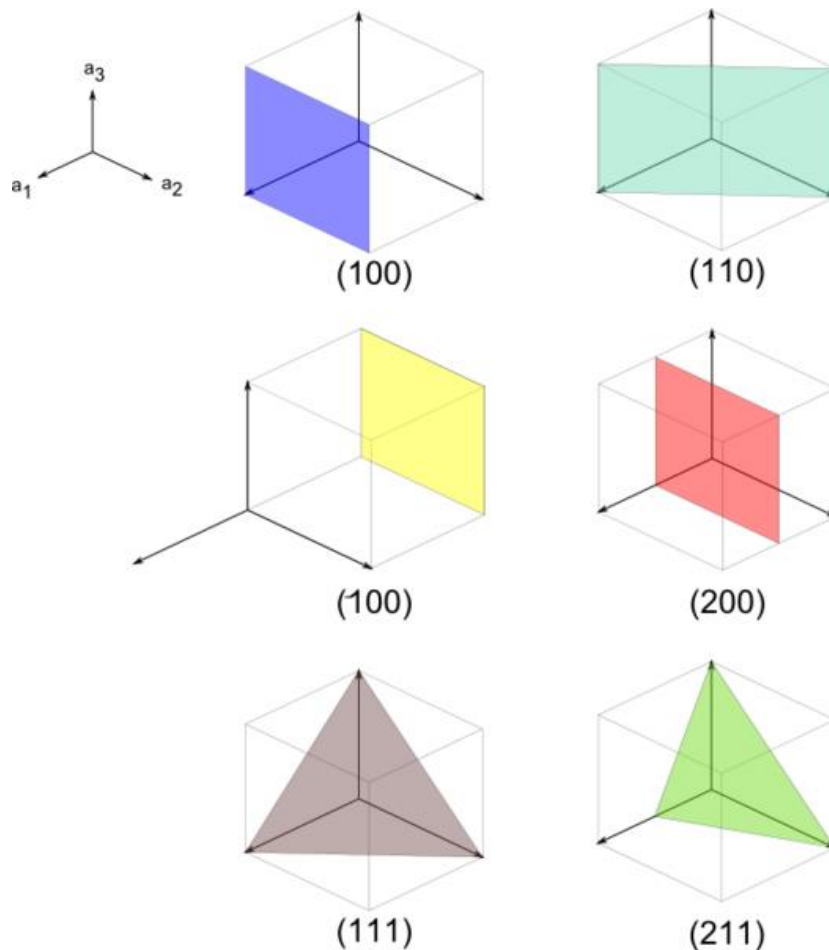
- **Índice:** Son números sencillos que indican la posición de una cara de un cristal, con respecto a los ejes cristalográficos y son expresiones simplificados y abreviados de los parámetros. Existen varios métodos, el más conocido es la de Miller.
- **Plano axial:** El plano que forma dos ejes cristalográficos. Los espacios comprendidos por la intersección de tres planos axiales se llama octantes, y los espacios formados por cuatro planos axiales se llaman Sectantes.

INDICES DE MILLER

Los Índices de Miller de una cara consisten en una serie de números enteros que se han derivado de los parámetros por inversión y reducción de los quebrados resultantes. Los índices de una cara se dan en tal orden que los tres números se refieren a los ejes a , b y c , respectivamente, y por tanto se omiten las letras que indican los diferentes ejes. Los índices al igual que los parámetros expresan una relación.

Los índices se expresan de la forma (hkl) donde cada letra representa un número entero. Los índices son los inversos de los parámetros; si por ejemplo, tuviéramos como parámetros a $1a$, $1b$ y $1c$ los índices serían (111) ; si fueran los parámetros $1a$, $1b$, ∞c los índices serían (110) ; si los parámetros fueran $1a$, $1b$, $2c$ los índices serían (221) .

En general, los índices de Miller se utilizan para identificar, ya sea, la posición de los puntos de la red, donde generalmente se encuentran átomos, las direcciones dentro y fuera de las celdas, así como para definir los planos formados por los átomos de una estructura dada.



A. ÍNDICES DE MILLER PARA DIRECCIONES

Las propiedades de un material pueden depender de la dirección en el cristal a lo largo de la cual se mide la propiedad.

Los índices de Miller para las direcciones es una notación abreviada usada para descubrir estas direcciones. El procedimiento para obtener dichos índices es como sigue:

- ✚ Utilizando un sistema de coordenadas derecho, se determinan las coordenadas de dos puntos que están en esa dirección
- ✚ Se restan las coordenadas del punto “de atrás” de las del punto “de adelante” para obtener el número de parámetros de red medidos en la dirección de cada eje del sistema de coordenadas.
- ✚ Se eliminan las fracciones y/o se reducen los resultados obtenidos de las restas, a los enteros mínimos.
- ✚ Se enuncian los números entre corchetes. Si se obtiene un signo negativo, se representa con una barra sobre el número.

Hay varios aspectos que deben señalarse acerca del uso de los índices de Miller para direcciones.

- 1) Una dirección y sus negativos no son idénticos; $[100]$ no es igual a $[\bar{1}00]$. Representan la misma línea pero direcciones opuestas.
- 2) Una dirección y su múltiplo son idénticos; $[100]$ es la misma dirección que $[200]$. sólo se omitió reducir a mínimos enteros.
- 3) Ciertos grupos de direcciones son equivalentes; sus índices particulares dependen esencialmente de la forma en que se establecen los ejes de coordenadas. Por ejemplo, una dirección $[100]$ es una dirección $[010]$ si redefinimos el sistema coordinado como se muestra en la Fig. 2.6. los grupos de direcciones equivalentes se denominan familia de direcciones. Se usan paréntesis angulares $\langle \rangle$ para indicar este conjunto de direcciones. Todas las direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ se muestran en el cuadro.

Familia	Componentes	
$\langle 110 \rangle$	$[110]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$
	$[101]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$
	$[011]$	$[0\bar{1}\bar{1}]$
	$[\bar{1}10]$	$[\bar{1}10]$
	$[\bar{1}01]$	$[\bar{1}01]$
	$[01\bar{1}]$	$[01\bar{1}]$

B. ÍNDICES DE MILLER PARA PLANOS

Ciertos planos en un cristal son también importantes. Por ejemplo, los metales se deforman a lo largo de los planos de átomos que están más estrechamente unidos. Los índices de Miller pueden usarse como una notación abreviada para identificar estos importantes planos. El procedimiento para obtener dichos índices es como sigue:

- ✚ Se identifican los puntos en los cuales el plano se intersecta a los ejes coordenados x, y, z en función del número de parámetros de red. Si el plano pasa por el origen, del sistema de coordenadas debe ser desplazado.
- ✚ Se obtiene los recíprocos de estas intercepciones.
- ✚ Se eliminan las fracciones pero no se reduce a mínimos enteros.
- ✚ Se encierran las cifras resultantes entre paréntesis (). De nuevo, los números negativos se presentan con una raya sobre la cifra.

Deben destacarse varios aspectos importantes de los índices de Miller para planos.

1. Los planos y sus negativos son idénticos (no es este el caso para las direcciones).
2. Los índices de Miller de un plano y sus múltiplos no presentan planos idénticos (de nuevo esto se contrapone a lo determinado para las direcciones). ($hkl \neq ah\ ak\ al$), donde a es un número entero.
3. En cada celda unidad, los planos de una familia presentan grupos de planos equivalentes que tienen sus índices particulares debido a la orientación de las coordenadas. Estos grupos de planos similares se presentan mediante llaves, o sea con $\{ \}$. Los planos de la familia $\{110\}$ se muestran en el cuadro.
4. En sistemas cúbicos, una dirección que tiene los mismos índices de un plano es perpendicular a este. Sin embargo, esto no siempre es válido para celdas no cúbicas.

Cuadro Planos de la familia $\{110\}$.

Familia	Componentes
$\{110\}$	(110)
	(101)
	(011)
	$(\bar{1}10)$
	$(1\bar{0}1)$
	$(01\bar{1})$

ÍNDICES DE MILLER PARA PLANOS EN CELDAS HEXAGONALES

Un grupo especial de índices de Miller – Bravais ha sido diseñado para celdas unitarias hexagonales debido a la singular simetría del sistema. El sistema de coordenadas utiliza cuatro ejes en lugar de tres, siendo redundante uno de los ejes, donde la tercera coordenada es la suma de las dos primeras con signo negativo ($h+k = -l$). el procedimiento para encontrar los índices es exactamente el mismo que antes, porque se necesitan cuatro intercepciones. No obstante, los índices de Miller para direcciones suelen utilizar un sistema coordenado de tres ejes.

EVIDENCIA DE LA ESTRUCTURA INTERNA REGULAR DE LOS CRISTALES

La evidencia de que los cristales poseen estructuras internas regulares la tenemos cuando consideramos sus diversas propiedades, especialmente exfoliación, forma externa y comportamiento ante la luz y los rayos x.

- **Forma Externa:** Si consideramos que los cristales están formados por la repetición tridimensional de una unidad estructural (celda unitaria), las caras que la limitan dependen tanto de tales unidades como el medio ambiente en el cual aquellas se agrupan. El medio ambiente incluyen influencias externas tales como la temperatura, presión, naturaleza de la solución, velocidad en la formación del cristal, tensión superficial y dirección de difusión en la solución.

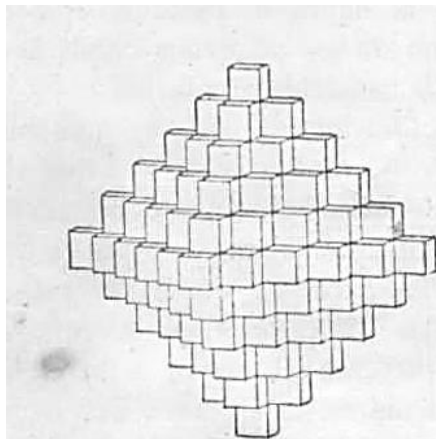


Fig. 2. Octaedro formado por pequeños cubos.

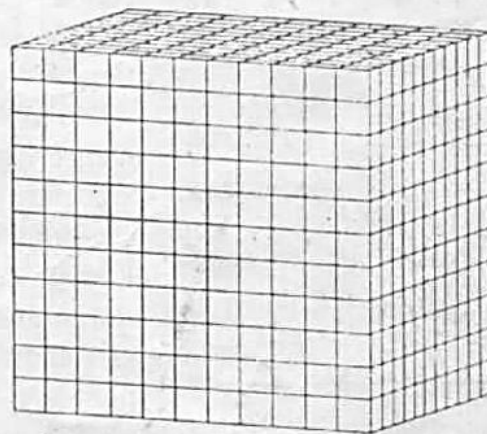


Fig. 3. Cubo formado por pequeños cubos.

La presencia de un sólido limitado por caras planas no podría, por sí solo, considerarse como una prueba de un orden interior, pero entre los minerales, cientos de cristales de la misma substancia que tienen todos una forma similar, puede afirmarse que la forma es el resultado de la misma estructura interna ordenada en cada cristal.

En la figura demuestran cómo es posible que cristales de un mineral dado tengan formas externas diferentes, como expresión externa de la misma estructura interna.

Como en el caso de los ladrillos, las unidades estructurales son las mismas en el cubo que en el octaedro, pero varia el régimen del crecimiento en diferentes direcciones. Estas formas son corrientes en la galena, pero las unidades componentes son tan pequeñas que las caras resultantes externas son superficies planas. La fluorita, por el contrario, tiene con frecuencia la forma de octaedros formados por muchos cubos pequeños. Debe tenerse en cuenta que cada uno de los pequeños cubos contiene en realidad muchas celdas unitarias.

Para una estructura interna dada existen solamente cierto número de planes probables que sirvan para limitar un cristal. Más aun; deben tenerse presente que, comúnmente, aparecen muy pocos. Las posiciones de las caras de un cristal vienen determinadas por las direcciones en las que la estructura interna presenta el mayor número de puntos o nudos reticulares. Los planos que incluyen el mayor número de nudos con los que con mayor frecuencia se encuentran como caras en los cristales. Los nudos están igualmente espaciados unos de otros y tienen una disposición rectilínea, puede observarse que hay varias filas posibles a través de la red que incluyen mayor o menor número de nudos. Estas filas representarían la traza, en esta sección, de planos posibles los que incluyen el mayor número de nudos reticulares los que cortan AB y AC, serían los más comunes. La regla que acabamos de mencionar, conocida por la Ley de Bravais es generalmente, confirmada por la observación.

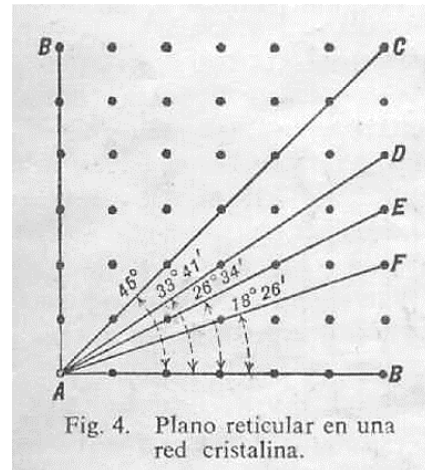
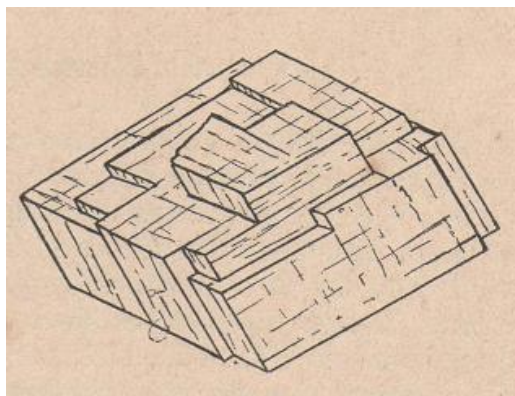


Fig. 4. Plano reticular en una red cristalina.

- **Exfoliación:** La exfoliación es esa propiedad que poseen muchos cristales de romperse según caras planas. En la Calcita existen 3 direcciones de exfoliación que le permiten romperse en fragmentos romboédricos no teniendo importancia para ellos el tamaño







de las partículas finales. Uniendo estos fragmentos romboédricos en una forma regular, se pueden construir modelos con la misma configuración de caras y ángulos que mostrara cualquier cristal de calcita. Si la estructura interna de la calcita fuera heterogénea hubiera sido inexplicable la exfoliación. Esto solamente puede explicarse aceptando cierta estructura interna definida que permita y controle dicha exfoliación.

- **Propiedades Ópticas:** Otra evidencia que indica la regularidad de la estructura interna de los cristales se encuentra en el comportamiento de la luz en los cristales. Si los cristales carecieran del orden de la distribución interna y estuvieran formados por átomos mezclados al azar y de manera caótica, deberíamos esperar de las reglas

generales de la probabilidad que la luz que se mueve a través de los cristales hallaría la misma distribución atómica a lo largo de cualquier camino. Sería, por tanto, frenada una cantidad igual independientemente de la dirección. Esto es cierto para los vidrios y deducimos de esta uniformidad en el comportamiento de la luz en los vidrios que tienen estructura interna caótica y desordenada. En la mayoría de los cristales, sin embargo, la velocidad de la luz es una función de la dirección en la que vibra. En la calcita la diferencia en velocidad entre la luz que vibra en dos planos normales entre sí es tan grande que cuando un objeto se examina a través de un bloque transparente del mineral, se ve una imagen doble. La separación entre las dos imágenes es proporcional al espesor del bloque de calcita y puede decirse que cada imagen está formada por luz que está completamente polarizada, es decir, tiene un plano definido de vibración relacionado con direcciones cristalográficas. Tal fenómeno no puede ser explicado a no ser por la influencia decisiva del cristal.

FUENTES BIBLIOGRAFICAS.

-  Hurlbut. C. (1980). "Manual de Mineralogía de Dana". 2da Edición.
Ed Reverte SA. Barcelona.
-  Lucio Vasquez Briseño (2005). "Índices de Miller". 2da Edición.
UAM Azcapotzalco. México.
-  Muedra V (1960). "Manual de Cristalografía Elemental". 3era Edición.
Ed Paraninfo. Madrid.
-  "Manual de Mineralogía del curso"

ANEXOS

(Diapositivas de la Exposición)